

Title	多孔質金属の表面特性
Author(s)	袴田, 昌高
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2016), 2016: 53-53
Issue Date	2016
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/214363">http://hdl.handle.net/2433/214363</a>
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

多孔質金属の表面特性  
Surface properties of porous metals

京都大学大学院エネルギー科学研究科エネルギー応用科学専攻  
資源エネルギーシステム学分野 袴田昌高

研究成果概要

ナノポーラス金属は、ナノメートルオーダーにまで微細化された孔径・リガメント径の多孔質構造を有する金属であり、比表面積の大きさ・導電性・触媒特性など、バルクの金属にはない性質が現れる。ナノポーラス金の室温の電気抵抗率を空気中および水中で測定し、その差を評価した結果、バルク金(スパッタリング薄膜)に比べてナノポーラス金の差が大きくなった。本研究では京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて第一原理計算を利用し、金表面に水分子が吸着することによる電子状態の変化を計算した。

金 (111) 表面に水分子が吸着した原子モデルを作成し、第一原理計算に供した。この際、金 (111) の格子ひずみを $\pm 2.5 \sim 5.0\%$ 変化させることでナノポーラス金の表面を模擬することとした。

水分子の吸着エネルギーを計算した結果、格子ひずみがない場合に比べ、格子ひずみが正であると水分子はより安定して吸着する(吸着エネルギーが負で絶対値が大きい)ことがわかった。ナノポーラス金の表面には大きな曲率に由来して正負さまざまな格子ひずみが導入されることがわかっているが、正の格子ひずみにより水分子の吸着がより起こりやすくなることが示唆される。

さらに、水分子吸着直下の金原子のフェルミ準位における状態密度を算出した結果、吸着のない場合に比べて低下していることがわかった。このことから、水分子の吸着によりフェルミ準位の状態密度が下がり、結果としてナノポーラス金の電気抵抗率が上がった可能性が示唆された。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし